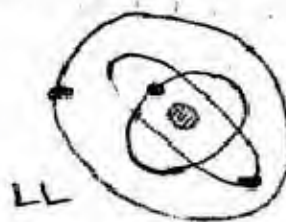


Modèles quantiques de l'atome

1°/ Le modèle de Rutherford :

- Les travaux de Rutherford ont permis de constater le modèle de l'atome : un noyau central unique, chargé positivement et entouré d'e- charge négativement gravitent sur des droites circulaires.



- Pour l'atome d'H l'e- est soumis à un système de forces comprenant la force centrifuge et la force d'attraction électrostatique du noyau agissant sur l'e-.
- Soit la masse m de l'e-, v sa vitesse, e sa charge et la charge de noyau (proton), r le rayon de l'orbite (égal à la distance e- - noyau).
- La force d'attraction est donnée par la relation de Coulomb, elle a pour module :

$$|\vec{F}_a| = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r^2} +$$

- la force centrifuge a pour module :

$$|\vec{F}_c| = \frac{m \cdot v^2}{r} \quad \text{ou} \quad m \cdot \frac{v^2}{r} + (mv \text{ circulaire})$$

- Les 2 forces sont radiales et de direction opposées donc l'équilibre se traduit par :

$$|\vec{F}_a| = |\vec{F}_c| = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r^2} = \frac{m \cdot v^2}{r}$$

$$\Rightarrow m \cdot v^2 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r}$$

• On a $E_c = \frac{1}{2}mv^2 \Rightarrow E_c = \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r}$

• D'autre part l'énergie totale $E_T = E_c + E_p$

E_p = énergie potentielle et E_c = énergie cinétique

$E_p = q\phi$

$\phi = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e}{r}$

$= \frac{e}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{r}$

$E_T = E_c + E_p = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{r} +$

• D'après le modèle on aboutit au résultat suivant:

+ l'énergie E est fct de r , donc elle varie.

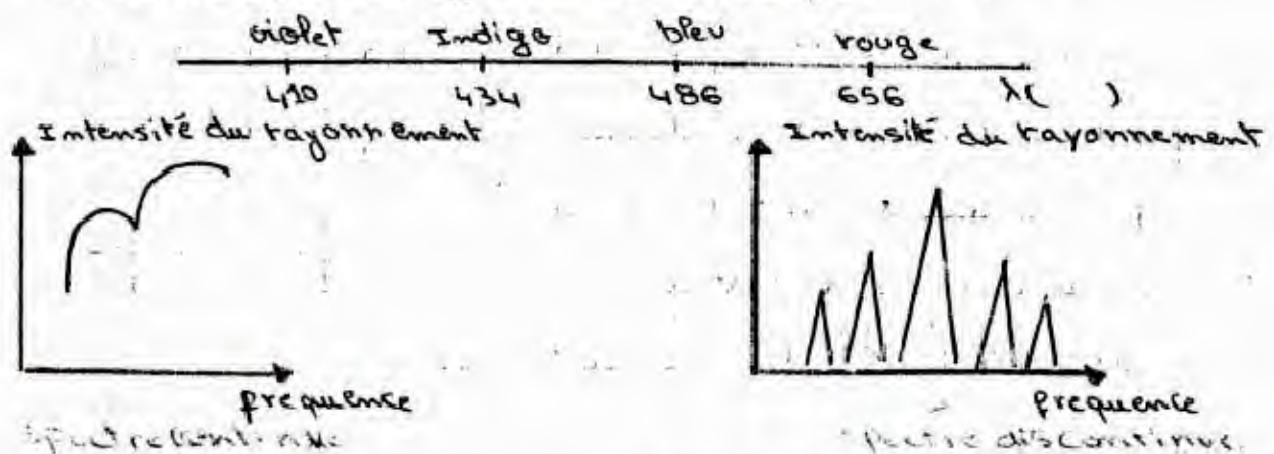
+ D'après la théorie de l'e-magnétisme, lorsqu'une particule chargée est soumise à une accélération elle doit rayonner.

+ Si la particule rayonne, son énergie doit diminuer et rediminuer d'après l'expression de E , par la suite l'e- devrait tomber sur le noyau.

+ Ces résultats sont en contradiction avec l'expression.

+ l'atome d'H dans un état fondamental ne rayonne pas.

+ le spectre d'émission de l'H est un spectre discontinu ou spectre de Balmer (formé de 4 raies).



• Ce spectre peut s'interpréter à l'aide de la relation.

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$$

G = nombre d'onde.

met n sont des nombres entiers avec $m, n \neq 0$.

R_H = constante de Rydberg pour H = $109677,6 \text{ cm}^{-1}$.

Conclusion:

- 1/ Les contradictions impliquées dans le modèle de Rutherford, Bohr, avait proposé une autre théorie.

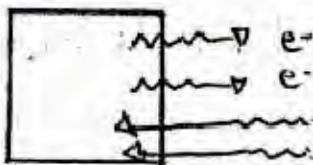
2° Le modèle de Bohr

a) théorie de quantas

La nature ondulatoire de la lumière permet d'expliquer plusieurs phénomènes optiques tel que la réflexion la réfraction, les interférences ect... une radiation lumineuse est caractérisée par une longueur d'onde λ et une fréquence ν :

c : vitesse de la lumière

$$\nu = \frac{c}{\lambda}$$



rayonnement U.V.

lampe métérique.

Les e^- émis sont appelés des photoélectrons, pour interpréter ce phénomène, PLANCK puis EINSTEIN ont attribué à la lumière une nature discontinue corpusculaire, un rayonnement apparaît sous forme de grain de lumière qui sont les photons. Ces grains correspondent à des "paquets d'énergie" appelés quanta.

L'énergie d'un quantum est donnée par :

ν = fréquence de la radiation.

$$E = h\nu$$

h = constante de Planck = $6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J.s}$.

Conclusion:

un corps ne peut donc libérer ou absorber de l'énergie que par multiples entiers de quantum d'énergie, on dit alors que

l'énergie est quantifiée.

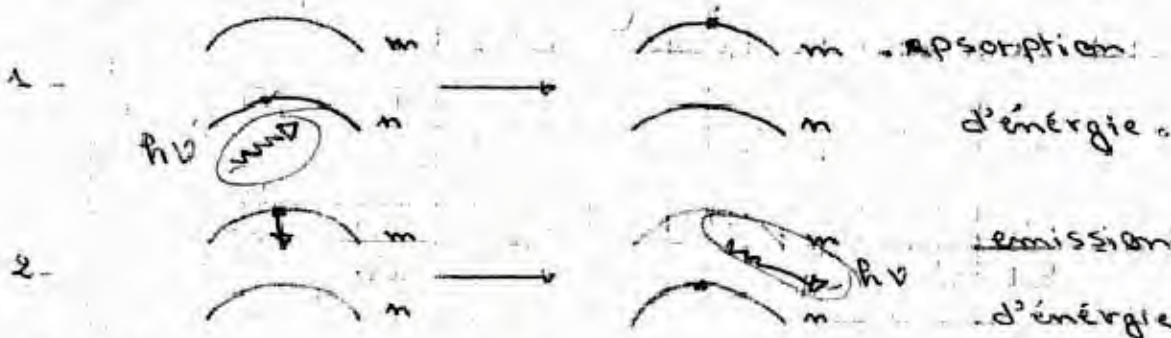
b) Modèle de l'atome de Bohr :

Bohr utilise la théorie des quanta pour améliorer le modèle de "Rutherford" et il émet les hypothèses suivantes :

• un e^- ne rayonne pas sur sa trajectoire, il occupe des niveaux d'énergie bien déterminés (E_1, E_2, E_3, \dots) qui correspondent à des trajectoires circulaires stables et son énergie est quantifiée.



$$\Delta E = E_m - E_n = h\nu$$

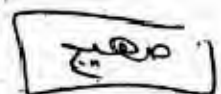


• En absence d'une excitation externe, l' e^- se trouve sur le niveau d'énergie le plus bas, c'est à dire l'état fondamental.



• état fondamental.

• état excité.



• Ceci explique bien le spectre d'émission de l'H.

* L' e^- tourne autour du noyau, il possède donc un mouvement cinétique. Ce dernier doit être quantifié.

$$\vec{L} = \vec{r} \wedge m\vec{v}$$

$$L = n\hbar = n \cdot \frac{h}{2\pi}$$

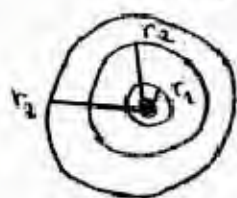
• par ailleurs on a :

$$mv^2 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

$$\Rightarrow v = \frac{nh}{2\pi m r}$$

$$\Rightarrow m \frac{v^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \Rightarrow r_n = \frac{E_0 \hbar^2}{\pi m e^2} \cdot n^2 = \text{cte} \cdot n^2 \quad (n \in \mathbb{N}^*)$$

On voit que r (rayon de la trajectoire de Bohr) est quantifié.



$$\Rightarrow E = E_n = - \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \cdot \frac{\pi m e^2}{E_0 \hbar^2 n^2}$$

$$\Rightarrow E_n = - \frac{m e^4}{8 E_0^2 \hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}$$

E_n ne dépend que de n donc elle est quantifiée.

Remarques:

On a considéré le noyau fixe autour de quel gravité e^- , mais il faut tenir compte que le noyau est en mouvement. Donc il faut prendre origine de centre de gravité du système noyau e^- , on introduit alors la masse réduite du système.

$$\frac{1}{N} = \frac{1}{M} + \frac{1}{m} \Rightarrow N = \frac{mM}{m+M} \cdot n^2 \quad (m \ll M ; N \approx m)$$

$$\Rightarrow E_n = - \frac{N e^4}{8 E_0^2 \hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}$$

et

$$r_n = \frac{E_0 \hbar^2}{\pi N e^2} \cdot n^2$$

c) Spectre d'émission de l'hydrogène

Si l' e^- passe d'un état d'énergie E_m à un état inférieure E_n ,

il y a émission de rayonnement de fréquence ν telle que :

$$\begin{array}{c} n \\ \text{---} \\ | \quad \nearrow \quad h\nu \text{ émission} \\ m \text{---} \end{array}$$

$$\Delta E = E_m - E_n = h\nu$$

$$\nu = \frac{1}{\lambda} = \frac{v}{c} = \frac{E_m - E_n}{h c}$$

$$\text{ce qui donne : } \nu = \frac{N e^4}{8 E_0^2 h c} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

Cette relation est identique à la relation déjà vue :

$$\boxed{\nu = R_H \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)} \quad \text{Relation de RITZ}$$

D'où la constante de Rydberg :

$$\boxed{R_H = \frac{N e^4}{8 E_0^2 h^3 c}}$$

A.N :

$R_H = 109677,6 \text{ cm}^{-1}$; cette valeur est en bon accord avec

l'expression de l'hydrogène dans son état fondamentale occupe

Le niveau de plus bas énergie c'est à dire $n=1$.

$$E_1 = \frac{-Ne^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \Rightarrow E_1 = -21,8 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

$$1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J} \Rightarrow E_1 = -13,6 \text{ eV}$$

Les états excités correspondent à des énergies supérieures.

$$E_n = E_1 \cdot \frac{1}{n^2} = -13,6 \cdot \frac{1}{n^2}$$

$$\begin{cases} n=2 \Rightarrow E_2 = -3,42 \text{ eV} \\ n=3 \Rightarrow E_3 = -1,51 \text{ eV} \\ n=4 \Rightarrow E_4 = -0,85 \text{ eV} \end{cases}$$

Selon la théorie de Bohr on aura des différentes transitions électroniques et chacune correspondra à l'émission d'une raie du spectre.

Série de Lyman : $n=1$ et $n \geq 2$ $m=6$

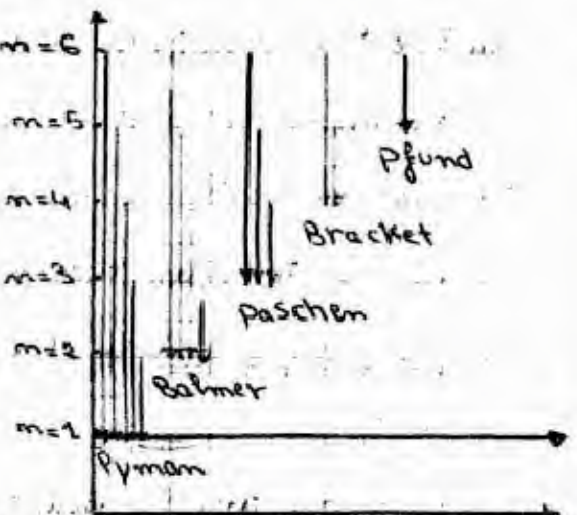
.. .. Balmer : $n=2$ et $n \geq 3$ $m=5$

.. .. Paschen : $n=3$ et $n \geq 4$ $m=4$

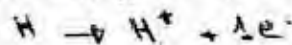
.. .. Brackett : $n=4$ et $n \geq 5$ $m=3$

.. .. Pfund : $n=5$ et $n \geq 6$ $m=2$

pour $n = \infty$; $E_{\infty} \rightarrow 0$



On définit l'énergie d'ionisation de l'hydrogène à l'état fondamental et le rayon de l'atome de Bohr.



$$E_i = E_{\infty} - E_1 = 0 + 13,6 = 13,6 \text{ eV}$$

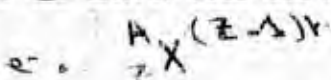
$$\text{Pour } n=2 \Rightarrow r_1 = a = \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi m e^2} = 0,529 \text{ \AA}$$

$$1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$$

$$a = 0,53 \text{ \AA}$$

d) l'hydrogénoides

Ce sont des éléments mono atomiques qui possèdent un seul



Exemples



• Le modèle de Bohr s'applique aussi aux hydrogénéoïdes. Il suffit de prendre la charge du noyau égal à Z , les formules précédentes deviennent alors :

$$r_n = \frac{\epsilon_0 \hbar^2 n^2}{\pi m_e Z e^2} = 0,53 \cdot \frac{n^2}{Z} (\text{\AA})$$

$$E_n = - \frac{m_e e^4}{8 \epsilon_0^2 \hbar^2} \cdot \frac{Z^2}{n^2} = -13,6 \frac{Z^2}{n^2} (\text{eV}).$$

$$\sigma = \frac{1}{\lambda} = Z^2 R_H (1/n^2 - 1/m^2) \quad \text{Relation de Rydberg.}$$

Conclusion :

• Le modèle de Bohr permet une très bonne interprétation du spectre d'émission d'H ; mais ce modèle était incapable d'expliquer le spectre des atomes à plusieurs e^- . Nous pouvons dire que ce modèle ne convient que pour les systèmes à 1 e^- ; D'où la nécessité d'un nouveau modèle.

3° / Le modèle ondulatoire de l'atome :

a) Comportement ondulatoire de la matière :

• On a vu que la lumière avait un double comportement ondulatoire caractérisé par une longueur d'onde λ et corpusculaire caractérisé par l'existence de particules (photons) transportant des parties d'énergie $h\nu$.

• De la même manière Louis de Broglie a émis l'hypothèse que la matière n'avait pas seulement un comportement corpusculaire mais qu'elle pouvait aussi être décrite par un comportement ondulatoire.

• Toute particule de masse m et de vitesse v est associée à une onde de longueur d'onde λ telle que :

$$\lambda = \frac{h}{m v}$$

• Ainsi Louis de Broglie postule que le concept de la dualité onde corpusculaire est une propriété générale aussi bien pour la matière que le rayonnement :

<u>onde</u>		<u>matière</u>
ν	\longleftrightarrow	$E = h\nu$
λ	\longleftrightarrow	$p = \frac{h}{\lambda}$

• Les travaux de Louis de Broglie ont été complétés par Schrodinger et Heisenberg, ce qui a donné naissance à la mécanique ondulatoire ou mécanique quantique.

b) principe d'incertitude d'Heisenberg :

"Il est impossible de connaître exactement à la fois la position et la quantité de mouvement d'une particule en mouvement"

Le principe se traduit mathématiquement par l'expression :

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{h}{2\pi}$$

• h : constante de Planck ($h = \frac{h}{2\pi}$) / Δp : incertitude sur la quantité de mouvement.

Δx : incertitude sur la position. / $p_x = m \cdot v_x \Rightarrow \Delta x \cdot \Delta v_x \geq \frac{h}{2\pi m}$

• On remarque que pour les particules lourdes, on retrouve les résultats de la mécanique classique, c'est à dire la position et la quantité de mouvement sont déterminées avec précision en effet :

$$m \uparrow \Rightarrow \frac{h}{2\pi} \downarrow \Rightarrow \Delta x \cdot \Delta v_x \approx 0$$

Conclusion :

Le principe d'incertitude implique qu'on a pas le droit d'appliquer la mécanique à la fois infiniment petit pour cela le en mécanique ondulatoire sera décrit par une fonction d'onde $\psi(x, y, z, t)$ appelée fonction d'onde, c'est une fonction mathématique qui peut être positive ou négative, réelle ou complexe.

c). la fonction d'onde :

les opérateurs :

• Un opérateur est le symbole d'un opérateur mathématique qui transforme une fonction f en une autre f' . $Op \cdot f = f'$

exemples :

• Soit $f(x) = x + a$ n'appliquons à f les opérateurs suivantes :

opérateurs	$Op \cdot f$	f'
a	$a \cdot f$	$ax + a^2$
$()^2$	$(f)^2$	$x^2 + 2ax + a^2$
$\int () dx$	$\int f(x) dx$	$\frac{x^2}{2} + ax + c$
$\frac{\partial}{\partial x}$	$\frac{\partial f(x)}{\partial x}$	a

propriétés des opérateurs :

• linéarité : Soit l'opérateur \tilde{A} ,

$$\tilde{A}(\alpha f + \beta g) = \alpha(\tilde{A}f) + \beta(\tilde{A}g).$$

• commutativité :

$$\tilde{A}(\tilde{B}f) = \tilde{B}(\tilde{A}f).$$

$$\Rightarrow \tilde{A}\tilde{B} = \tilde{B}\tilde{A} \text{ ou } \tilde{B}\tilde{A} - \tilde{A}\tilde{B} = 0 \text{ ou } [\tilde{A}, \tilde{B}] = 0.$$

• Si des opérateurs ne commutent pas $[\tilde{A}, \tilde{B}] \neq 0$.

• fonction propre : valeurs propres.

$$\text{si } \tilde{A}f = a \cdot f \Rightarrow a = \text{cte.}$$

• On a : f est fonction propre de l'opérateur \tilde{A} .

• a est valeur propre de l'opérateur \tilde{A} .

la fonction et l'onde de ψ :

• A une particule en mouvement on associe une onde dont

l'amplitude dépend de (x, y, z, t) .

• On définit $\psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z) e^{i\omega t}$ comme fonction

d'onde qui décrit une électrons.

- ψ n'a pas de sens physique, mais contient toutes les informations de la particule ψ appelé aussi fct d'onde peut être réelle ou complexe. $|\psi|^2 = \psi^* \psi$ est appelé densité de probabilité de présence de l'e- en un point donnée (on peut dire qu'il s'agit d'une densité électronique)

• $dP = \psi \psi^* dv \quad \psi \psi^* = |\psi|^2$

• Si ψ est réelle $dP = \psi^2 dv \Rightarrow dv = dx \cdot dy \cdot dz$

- ψ^2 doit être normé si on cherche l'e- dans tout l'espace on n'est sûr de le trouver $\int_{\text{espace}} |\psi|^2 dv = 1$

- ψ doit être unique la probabilité de trouver une e- en un point M ne peut avoir qu'une seule valeur En plus ψ est continue et finie par rapport à x, y, z
- au delà du rayon atomique dP décrit toujours en tend rapidement vers 0.

Conclusion:

On ne parle plus d'une trajectoire (orbite) pour l'e-, mais de probabilité de présence en un point de l'espace.

d) Equations de Schrödinger:

Les ψ et d'onde sont calculées à partir d'une équation différentielle appelée équation de Schrödinger, l'équation représente la relation fondamentale de la mécanique, elle s'écrit:

$$\hat{H} \psi = E \psi$$

\hat{H} : opérateur hamiltonien de système.

pour ψ : ψ et d'onde, ψ est propre de \hat{H} .

E : énergie totale de l'e- valeur propre de \hat{H} Résoudre l'équation de

Schrodinger consiste à déterminer ψ et ψ^* .

Expression de \hat{H} :

• A chaque grandeur classique A on attribue un opérateur \hat{A} .
 Les grandeurs de la mécanique classique qui ne font pas intervenir de dérivées restent inchangées comme opérateurs quantiques. Ils agissent sur ψ et par une simple multiplication grandeur physique.
 Mécanique classique opérateur associé.

x	$\hat{x} = x$	position
t	$\hat{t} = t$	temps
$px = mv_x$	$\hat{p}_x = \frac{h}{2\pi i} \cdot \frac{\partial}{\partial x} = \frac{h}{i} \frac{\partial}{\partial x}$	quantité de mouvement
$E_c = \frac{1}{2} m v_x^2$	$\hat{T} = \frac{h^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2}$	Energie cinétique

• grandeur physique. • Mécanique classique. • opérateur associé.

• énergie potentielle. • ex: $v = k \frac{x^2}{2}$ • $\hat{V} = k \frac{x^2}{2}$.

• Dans ce cas on le système évolue avec le temps, l'opérateur correspondant à l'énergie totale E_T et \hat{H} tel que $\hat{H} = \frac{h}{i} \frac{\partial}{\partial t}$.

• D'où: $\hat{H}\psi = \frac{h}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t}$ on a $E_T = E_c + V \Rightarrow \hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$.

$$\hat{T} = \frac{k^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) = -\frac{k^2}{2m} \Delta$$

Δ : opérateur de Laplace. $(\hat{T} + \hat{V})\psi = \frac{h}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t}$

• Cette équation admet des solutions particulières où les variables

d'espace (x, y, z) et de temps sont séparées $\psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z) e^{i\omega t}$

$\omega = 2\pi\nu$ (pulsation)

• c.à.d que ψ correspond à des états stationnaires où l'énergie ne dépend pas du temps c'est le cas des atomes et des molécules.

$$-\frac{h^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) e^{i\omega t} + V\psi e^{i\omega t} = \frac{h}{i} \psi \frac{\partial e^{i\omega t}}{\partial t}$$

$$-\frac{h^2}{2m} \Delta \psi e^{i\omega t} + V\psi e^{i\omega t} = V\psi e^{i\omega t} = \frac{h}{i} i\omega \psi e^{i\omega t}$$

$$\cdot \cdot \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V \psi = E \psi$$

$$\cdot \text{On a : } \omega = 2\pi\nu \text{ et } E = \hbar\omega \Rightarrow \omega = \frac{2\pi E}{\hbar} \Rightarrow E = \hbar\omega$$

$$\cdot \text{d'où : } \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V \psi = E \psi \Rightarrow \hat{H} \psi = E \psi \quad ; \quad \hat{H} = \frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V$$

La résolution de cette équation conduit correctement aux niveaux d'énergie établis par Bohr :

L'éq de Schrödinger ne peut être résolue que pour les systèmes à un seul e^- Hydrogène et ions hydrogénéides (He^+ , Li^{2+} , ...)

lorsqu'il y a plusieurs e^- il faut tenir, en plus de l'interaction noyau e^- de l'interaction $e^- \cdot e^-$

e) Application à l'atome d'hydrogène :

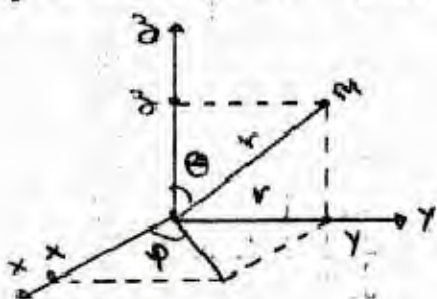
On rappelle que nous traitons l'atome d'hydrogène constituée d'un e^- qui gravite autour d'un noyau lourd suppose fixe les densités de probabilité $|\psi|^2$ pour l'atome d'hydrogène ne dépend pas du temps on va donc chercher les fonctions d'onde en fonction des coordonnées d'espaces (x, y, z) .

$$\cdot \hat{H} \psi = E \psi \quad \rightarrow \quad \hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$$

$$\cdot \hat{T} = \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \quad \text{et} \quad \cdot \hat{V} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{r}$$

$$\cdot \hat{H} \psi = E \psi \quad \Rightarrow \quad \boxed{\left(\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{r} \right) \psi = E \psi}$$

Le potentiel ne dépend que de r il est préférable de représenter ψ en coordonnée sphérique.



$$\begin{cases} x \\ y \\ z \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} r \\ \theta \\ \varphi \end{cases} \quad \begin{aligned} & \cdot 0 \leq r < \infty \\ & \cdot 0 \leq \theta \leq \pi \\ & \cdot 0 \leq \varphi < 2\pi \end{aligned}$$

$$\cdot x = r \sin \theta \cos \varphi$$

$$\cdot y = r \sin \theta \sin \varphi$$

$$\cdot z = r \cos \theta$$

$$\cdot dV = dx \cdot dy \cdot dz = r^2 \sin \theta \cdot dr \cdot d\theta \cdot d\varphi$$

• En coordonnées sphériques la Laplacien s'écrit :

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

• dans ces conditions l'expression de la fct d'onde $\psi(r, \theta, \varphi)$ peut être mise sous la forme :

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot \Theta(\theta) \cdot \Phi(\varphi)$$

• $R(r)$ est une fct radiale qui nous donne l'énergie de la fct $\psi(r, \theta, \varphi)$.
 $\Phi(\varphi)$ est une fct angulaire qui nous donne la forme de la fct la résolution de l'éq de Schrödinger (ne fait pas l'objet de notre programme) Notons le pendant que la résolution des fcts $R(r)$, $\Theta(\theta)$, $\Phi(\varphi)$ nécessite d'introduire des nombres entiers :

+ $R(r)$ nécessite l'introduction de n et l (les 2 premiers n°s quantiques)

+ $\Theta(\theta)$ nécessite l'introduction de l et m .

+ $\Phi(\varphi)$ de m .

• Donc la fonction d'onde s'écrit sous la forme :

$$\psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) = R_{n,l}(r) \cdot \Theta_{l,m}(\theta) \cdot \Phi_m(\varphi)$$

Les entiers n , l et m sont appelés nombres quantiques

4° Les nombres quantiques :

• Le nombre quantique principal n :

• est un entier positif ($n \geq 1$) qd définit l'énergie de l'atome.

$$E_n = - \frac{Ne^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \cdot \frac{1}{n^2}$$

• n donne une idée sur le volume de l'espace dans lequel l'e- se meut
 Ce volume est d'autant plus grand que n est grand qd définit donc la couche en l'e- se déplace.



* Le nombre quantique secondaire ou azimutal, l

- $0 \leq l \leq n-1$
- si $n=2 \Rightarrow l=0,1$
- si $n=4 \Rightarrow l=0,1,2,3$
- A une couche n correspond n sous couches.
- l est lié à la quantification du moment cinétique par :

$$\vec{L} = \vec{r} \wedge m\vec{v} \Rightarrow |\vec{L}| = \sqrt{l(l+1)} \cdot h$$
- l détermine la forme du domaine où l'e-bouge de nom de la sous couche est lié à la valeur de l .

l	0	1	2	3	4
Sous couche	s	p	d	f	g

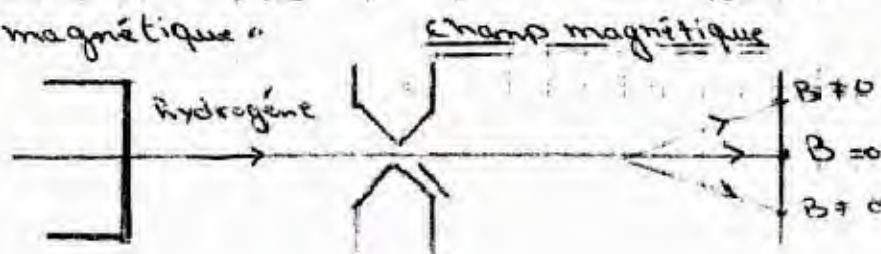
* Le nombre quantique magnétique m_l

- lié à la quantification de la projection suivant un axe de référence oz du moment cinétique orbital \vec{L} . m est entier prenant $(2l+1)$ valeurs d'où : $-l \leq m \leq l$.
- si $l=2 \Rightarrow m=-2, -1, 0, 1, 2$.

* Le nombre quantique de spin s

- l'étude du spectre d'émission des atomes, montre que les raies sont constituées par un ensemble de deux ou plusieurs raies très rapprochées les uns des autres.
- En réalité chacun des niveaux d'énergie précédent est dédoublé. Ce dédoublement a été attribué au sens de rotation de l'e- autour de lui-même.

« Stern et Gerlach ont mis en évidence l'existence d'un mouvement magnétique »



- Pour $B \neq 0$, la division du faisceau indique, Goudsmit et Uhlenbeck ont suggéré l'existence d'un moment magnétique de l'e⁻ appelé moment magnétique de spin Δ .

avec $\Delta = \pm 1/2$

Conclusion:

- l'état de l'e⁻ r. à d son niveau énergétique est caractérisé par quatre nombres quantiques n, l, m et Δ .

g) - Les orbitales atomiques O.A :

- Soit $\psi_{n,l,m}$ Solution de l'équation de Schrödinger permet de calculer la probabilité de présence de l'e⁻ ψ est appelé aussi orbitale atomique.
- l'orbitale atomique définit un état pour ne elle est obtenue mathématiquement sous forme d'un fct d'onde.
- Expressions mathématiques des O.A $\psi_{n,l,m}$ pour l'H et les Hydrogénoides :

<u>n</u>	<u>Couche</u>	<u>l</u>	<u>Sous-couche</u>	<u>m</u>	<u>O.A $\psi_{n,l,m} = R_{n,l}(r) \cdot Y_{l,m}(\theta, \phi)$</u>
1	K	0	s	0	$\psi_{1,0} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right) e^{-\frac{Zr}{a_0}}$
2	L	0	s	0	$\psi_{2,0} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-\frac{Zr}{2a_0}} \left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right)$
		1	p	-1	$\psi_{2,p_x} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{Zr}{a_0} e^{-\frac{Zr}{2a_0}} \sin\theta \cos\phi$
				0	$\psi_{2,p_y} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{Zr}{a_0} e^{-\frac{Zr}{2a_0}} \sin\theta \sin\phi$
				-1	$\psi_{2,p_z} = \dots \dots \dots \cos\theta$

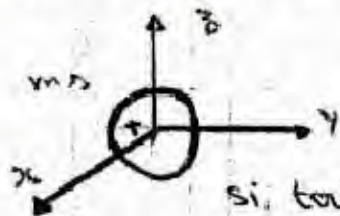
Z : numéro atomique. ; a_0 = rayon de l'atome de Bohr $0,53 \text{ \AA}$.

Représentation spatiale des O.A :

- orbitales s :

- Si $l=0$ ena $m=0$, désigné par ns, les fcts $\psi_{n,0,0}$ ne

dépendent que de la variable r . Pour une valeur constante de r , la fct $\psi_{m,0}$ a la même valeur quelque soient les valeurs de θ et ϕ . Le volume représentatif des O.A. $n,0$ est une sphère.



(+) représente la figure de la fct d'onde.

Si toutes les fct $n,0$ peuvent être représentées par une sphère, leur variation en fct de r dépend de la valeur de n .

Orbitales p

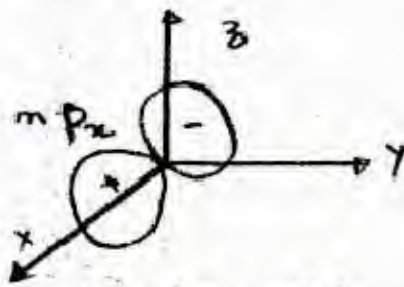
Les fct mathématiques correspondant aux orbitales p sont :

$$\bullet n p_x = R_{n,1}(r) \sin\theta \cdot \sin\phi$$

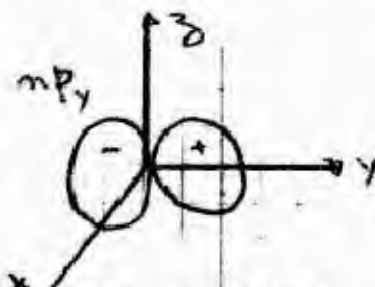
$$\bullet n p_y = R_{n,1}(r) \sin\theta \cdot \cos\phi$$

$$\bullet n p_z = R_{n,1}(r) \cos\theta$$

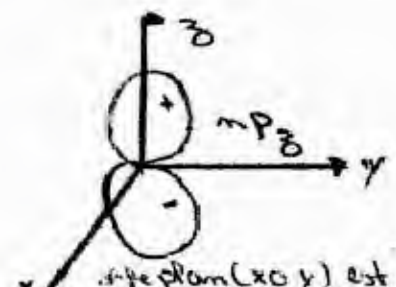
Les orbitales p correspondent à $l=1$ et $m = -1, 0, 1$, ils sont au nombre de trois.



Le plan (yoz) est nodal.



Le plan (xoz) est nodal.



Le plan (xoy) est nodal.

Le plan nodal est un plan où la fct s'annule.

Orbitale d

Elles correspondent à $l=2$ et $m = (-2, -1, 0, 1, 2)$ et m quelconque.

Il y a donc 5 orbitales que l'on note nd .

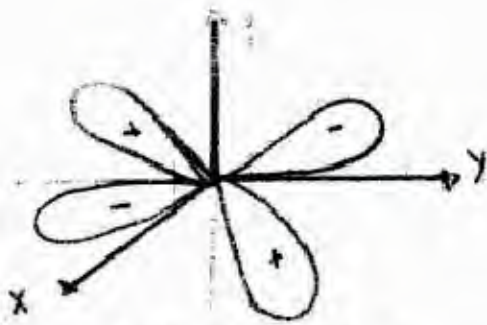
$$\bullet nd_{xy} = R_{n,2}(r) \sin^2\theta \cdot \sin 2\phi \quad (m=2)$$

$$\bullet nd_{yz} = R_{n,2}(r) \sin\theta \cos\theta \cdot \sin\phi \quad (m=-1)$$

$$\bullet nd_{z^2} = R_{n,2}(r) (3\cos^2\theta - 1) \quad (m=0)$$

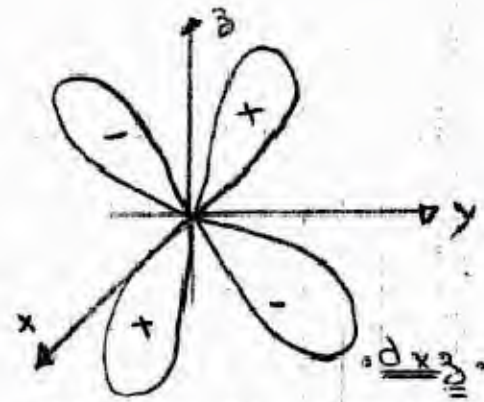
$$\bullet nd_{xz} = \dots \sin\theta \cos\theta \cos\phi \quad (m=1)$$

$$\bullet nd_{x^2-y^2} = \dots \sin^2\theta \cos 2\phi \quad (m=2)$$

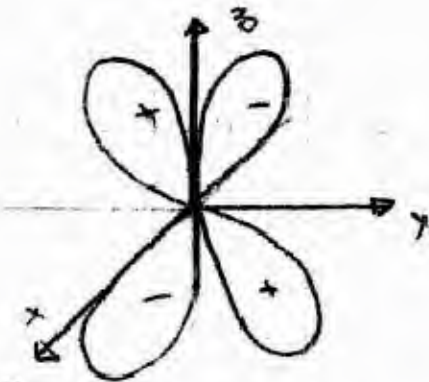


• dxy • Plan de •

• Symétrie (xoy) •

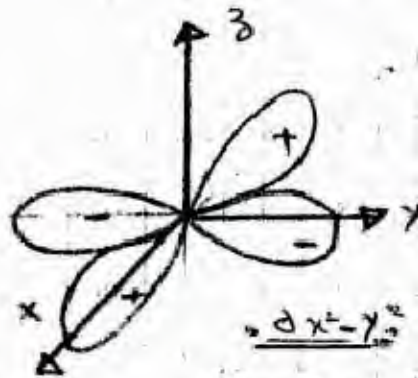


• dxz •
• Plan de symétrie •
(xoz)

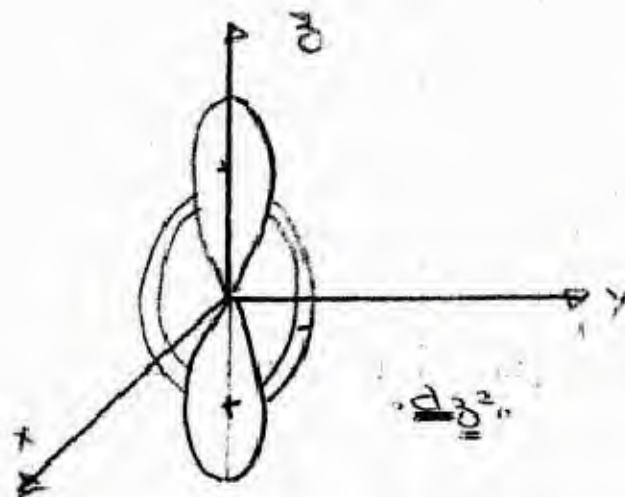


• dyz •

• Plan de symétrie •
(yoz)



• $dx^2 - y^2$ •
• Plan de symétrie •
(xoy)



• dz^2 •

• Plan de symétrie • (xoz)

• $n \Rightarrow$ couche : $n \geq 1$ (K L M N O ...)

• $l \Rightarrow$ sous-titre : $l \leq n-1$ •

{	$0 \Rightarrow s$
	$1 \Rightarrow p$
	$2 \Rightarrow d$
	$3 \Rightarrow f$

$$m \neq l \leq n \leq l$$

$$\begin{cases} m \text{ prend 1 seule valeur } 10 \text{ A.} \\ m \text{ " 2 valeur } 30 \text{ A.} \\ m \text{ " 3 " } 50 \text{ A.} \\ m \text{ " 4 " } 70 \text{ A.} \end{cases}$$

2. Probabilités

- fait de répartition radiale

La valeur de ψ^2 indique la probabilité de trouver l'e⁻ à une distance de terminée du noyau dans une direction bien définie

puisque : $|\psi^2| = |R(r) \cdot \Theta(\theta) \cdot \Phi(\varphi)|^2$

On fixe θ et φ , la probabilité de présence de l'e⁻ à une distance r du noyau sera donc donnée par la relation $|R(r)|^2$,
 ça s'appelle probabilité radiale en un point (ou probabilité ponctuelle).

Soit dv un élément de volume compris entre deux sphères de rayon r et $r+dr$.



$$V = \frac{4}{3}\pi r^3$$

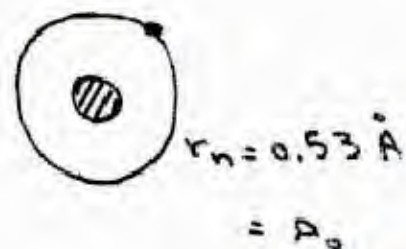
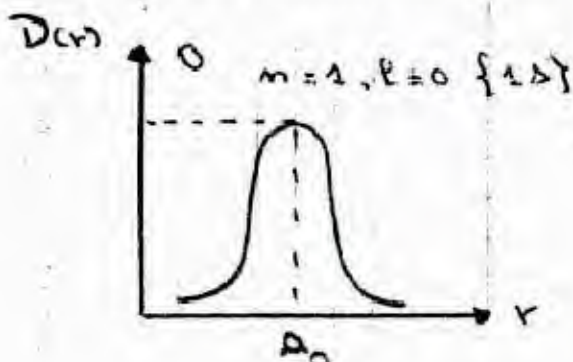
$$dv = 4\pi r^2 dr$$

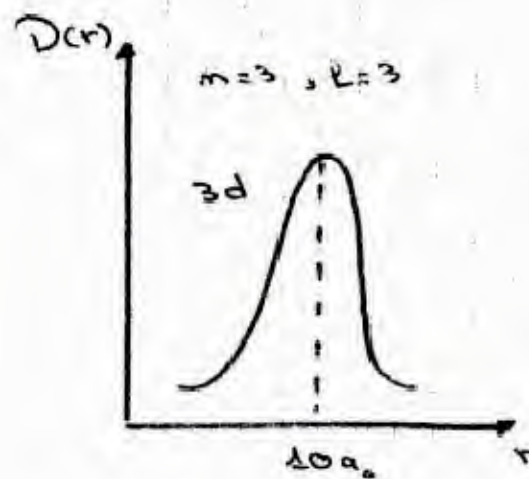
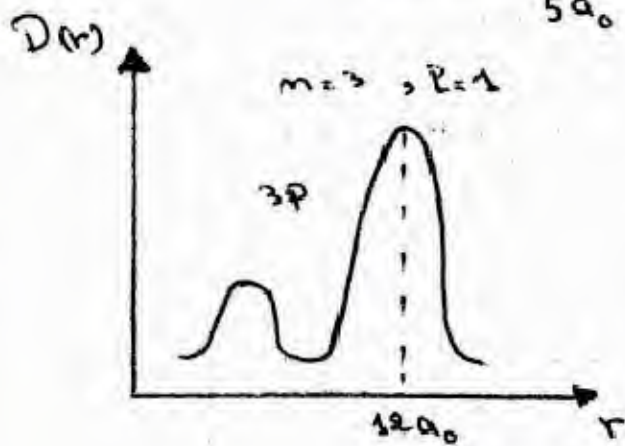
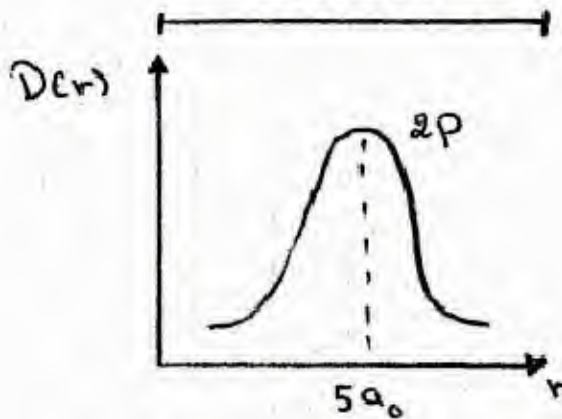
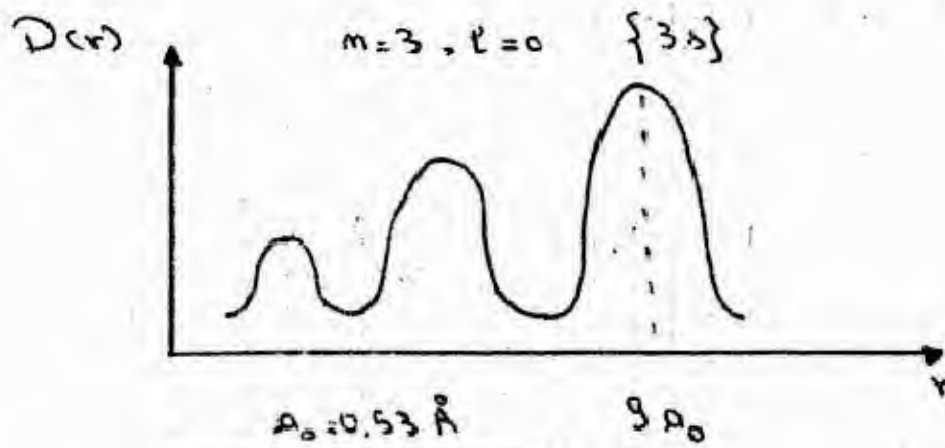
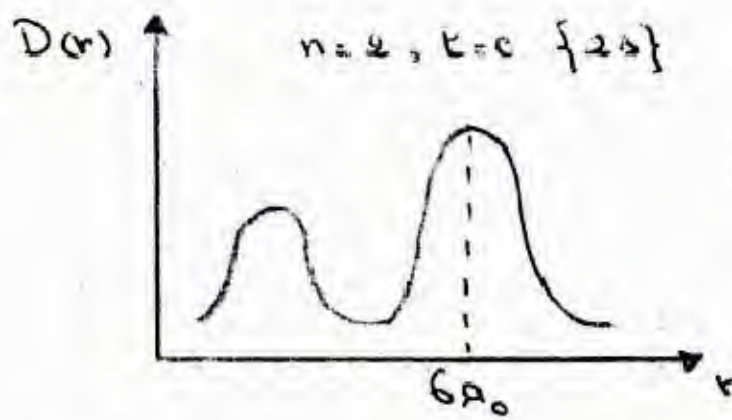
$$dP_{\text{rad}} = R^2(r) dv$$

$$dP_{\text{rad}} = 4\pi r^2 R^2(r) dr \Rightarrow \frac{dP_{\text{rad}}}{dr} = D(r) = R^2(r) \times 4\pi r^2$$

$D(r)$: Densité de probabilité radiale.

- Tracés de différentes courbes de probabilités







ETUSUP.com

Programmmation
Cours
Electricité
Physique
Résumés
Analyse
Livres
Exercices
Contrôles Continus
Langues
Thermodynamique
Multimedia
Divers
Economie
Travaux Dirigés
Chimie Organique
Informatique
Optique
Chimie
Diapo
Algèbre
Corrigés
Mathématiques
Mécanique
Travaux Pratiques
Droit

et encore plus..